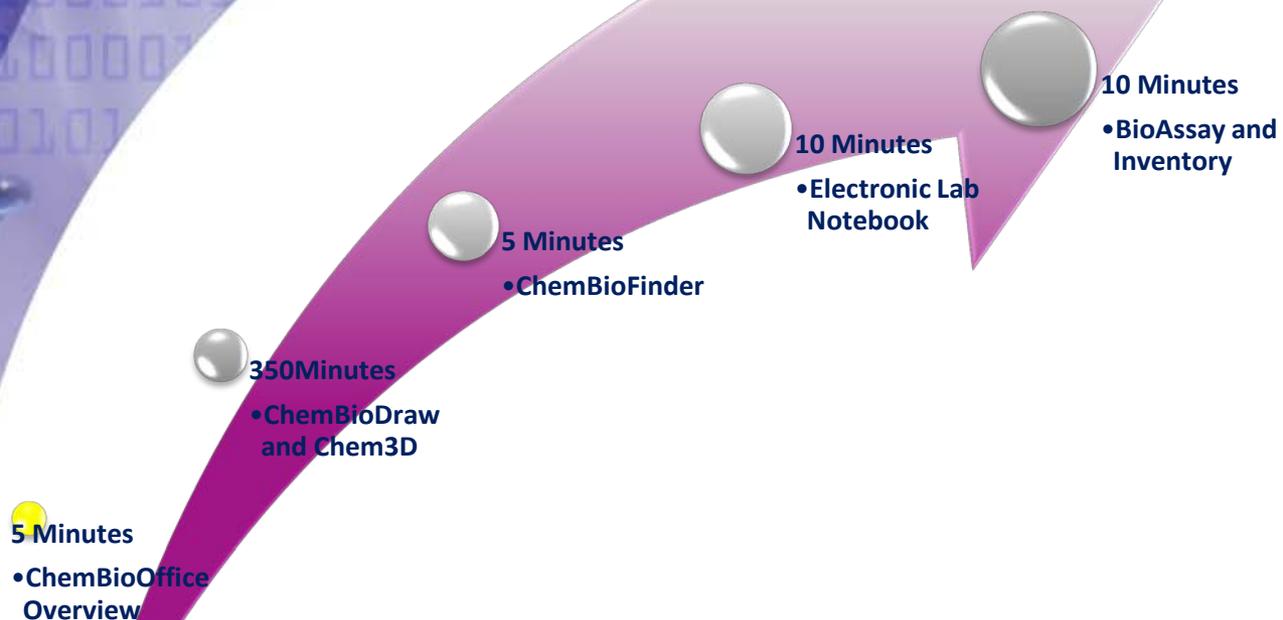


CambridgeSoft Solutions



CambridgeSoft®

*Life Science Enterprise Solutions
Naturwissenschaftliche Unternehmenslösungen
Solutions globales pour les sciences de la vie
ライフサイエンス・エンタープライズ・ソリューション*

ChemBioOffice 2010

Incrementa su productividad Científica



ChemBioOffice

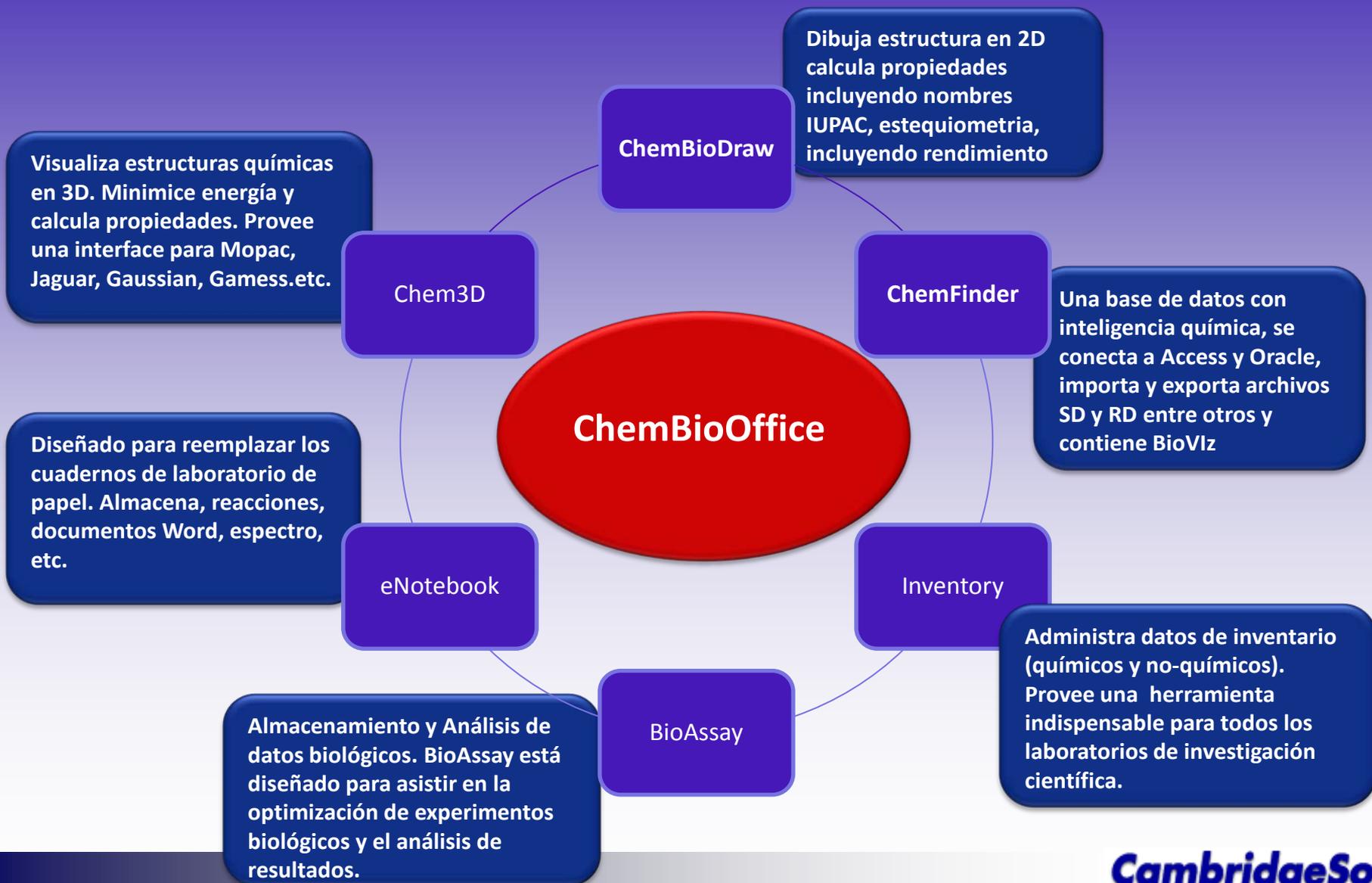
- ChemBioOffice es el software mas utilizado por científicos en la industria química y farmacéutica así como en la academia.
- ChemBioOffice pone al alcance de las manos las herramientas de Software requeridas por científicos
- ChemBioOffice se contiene soluciones de uso individual (ChemDraw) o de uso grupal (ELN), esto le provee un sistema completamente integrado de administración de datos científicos.

Licencias de Sitio Anuales de ChemBioOffice

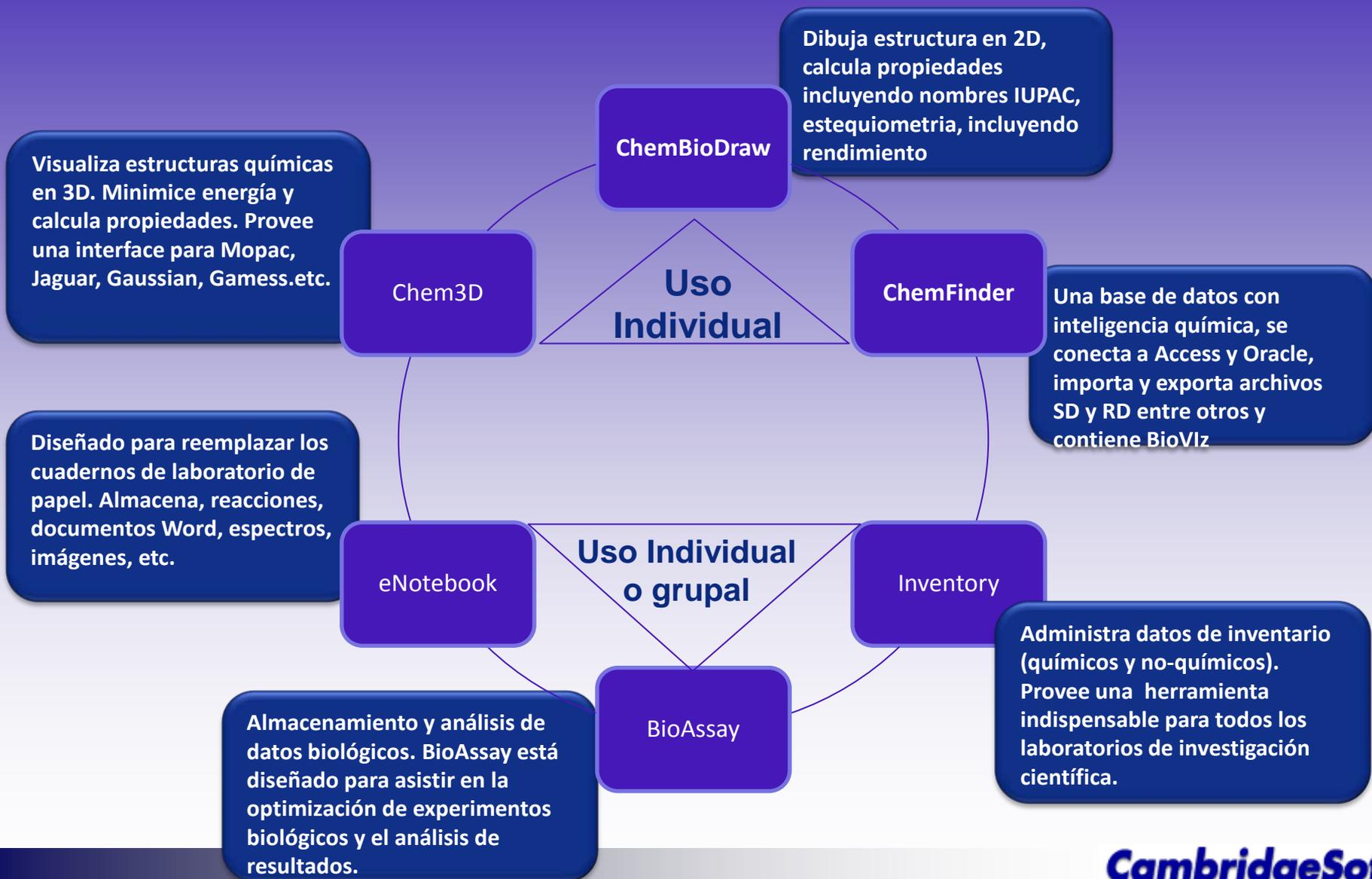
-Una gran oportunidad para colaborar.

- **Uso de todo el software es ilimitado para todos los miembros de su Institución (por lo tanto el costo por usuario es muy bajo)**
- **Todos los Departamentos y usuarios tienen acceso a usar el software que sea más apropiado para sus necesidades.**
- **Este tipo de licencias de sitio incluyen el soporte técnico para el administrador del sistema así como las actualizaciones del software.**
- **El software se puede usar en todo tipo de ordenadores, ya sea en el laboratorio, en la casa, o en un laptop.)**
- **Cada usuario puede descargar el software de nuestro website. Esto reduce la carga de trabajo en administración de los sistemas.**
- **Licencias por múltiples años son más convenientes en el largo plazo.**

Módulos en ChemBioOffice



Módulos en ChemBioOffice

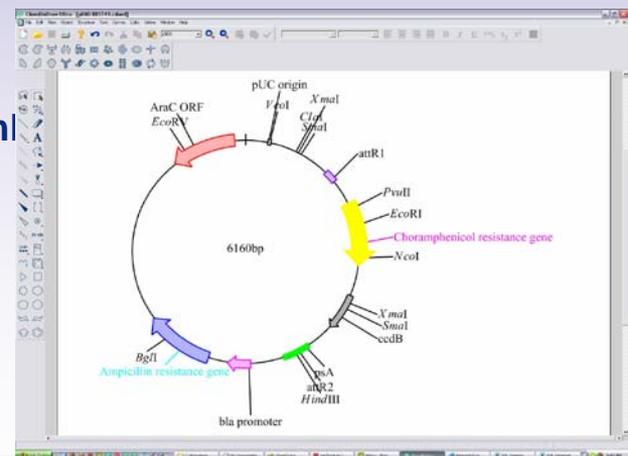


ChemBioDaw

Acelere su trabajo con ChemBioDraw 12

-Haciendo investigación en forma más productiva

- ChemDraw es fácil de usar
 - “Hot Keys” personalizadas, Plantillas (Templates), Apodos (Nicknames)
- Nuevas herramientas químicas
 - Dibujador de Secuencia
 - Limpieza de estructura y mejoras de la representación estequiométrica.
 - Nueva forma de interpretar reacciones, soporte de archivos SD y incorporación de lógica cuando se dibuja con groups R.
- Integración con otras aplicaciones
 - “LiveLink “o conexión directa con Bases de Datos como Chem3D LiveLink
- Inteligencia química de avanzada
 - Predicciones de Propiedades fisicoquímicas, nombres, Chem
- Nuevas herramientas BioDraw
 - Mejoras en la ilustración de procesos biológicos
 - Completamente integrado con ChemDraw
 - Nuevas herramientas para mapear Plasmids.



Genera estructuras a partir de un Nombre. Simplifica el trabajo de laboratorio

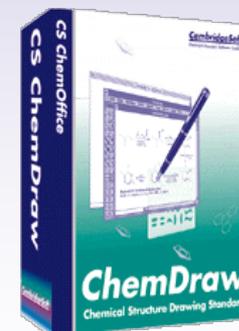
Lambda convention

Isotopes

Porphyrins

Inner salts

Name = Struct maneja multiple tipos de estructuras



Acelerando su trabajo con ChemDraw

- ChemDraw reduce el tiempo necesario para dibujar estructuras

“Hotkeys” personalizables

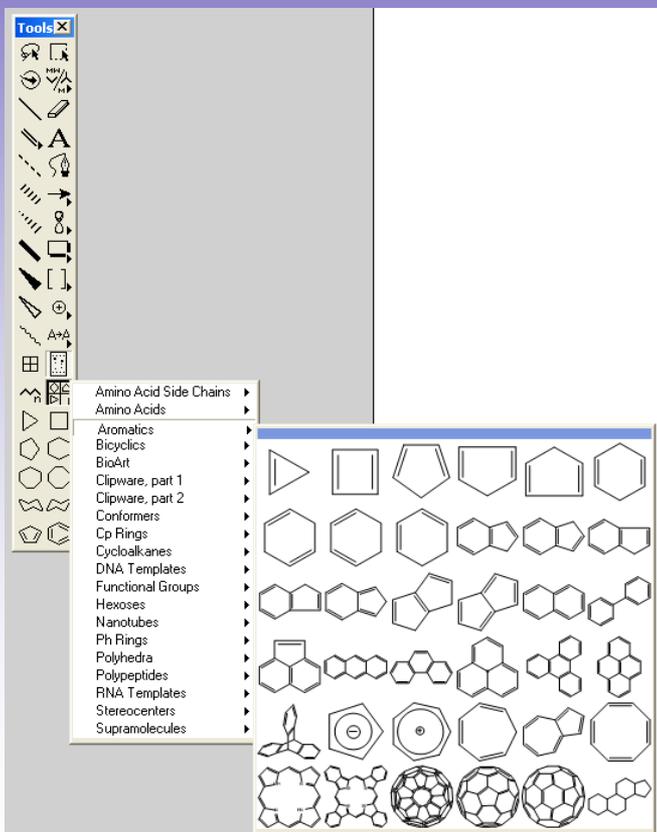
Hotkey	Resultados
1	Cambia a enlace simple
2	Cambia a enlace doble
3	Cambia a enlace triple
4	Cambia a enlace cuadruple
c	Centrar un enlace doble
l	Posicionar un enlace doble en la izquierda
f	Traer un enlace al frente
a	A
A or 5	Ac
b	Br

- Hotkeys ayudan a dibujar estructuras químicas en la mitad del tiempo
- No tiene que ir a cambiar herramientas en el menu principal
- Las hotkeys pueden ser adaptadas a sus requerimientos.

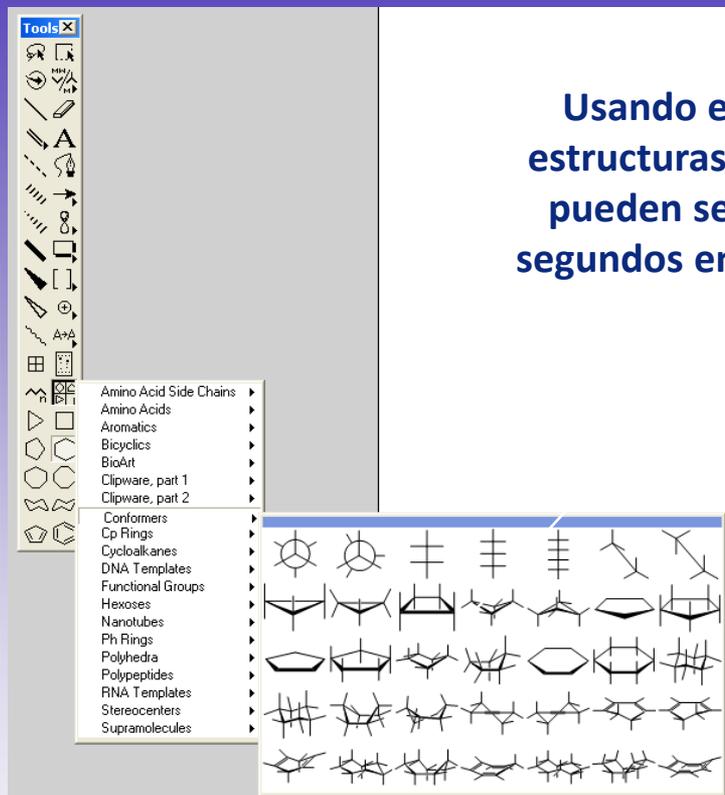
Acelerando su trabajo con ChemDraw

- ChemDraw reduce el tiempo necesario para dibujar estructuras

Plantillas personalizadas a sus requerimientos



Usando estas plantillas estructuras muy complejas pueden ser dibujadas en segundos en vez de minutos



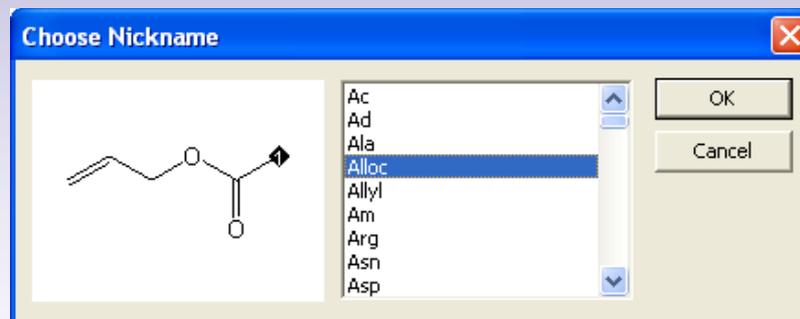
- Ahorre horas de trabajo usando las estructuras predibujadas.
- Cree sus propias estructuras y reduzca el tiempo cuando dibuja experimentos similares

Simplificando la apariencia de las estructuras

- Ideal para comunicar química en forma más efectiva

Apodos Personalizables (Nicknames)

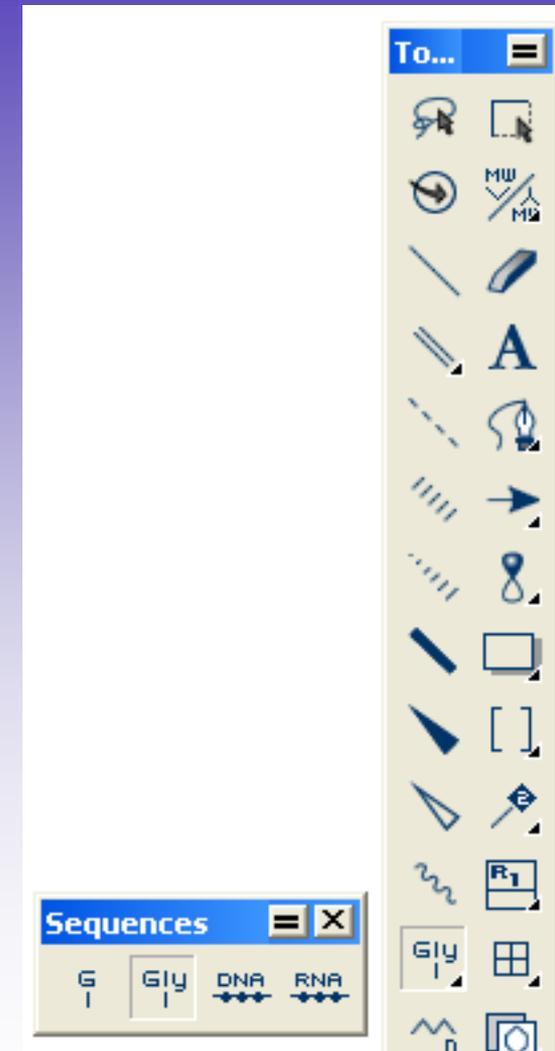
- Simplifique y acelere el dibujo químico usando “Nicknames”
- Dibuje estructuras donde partes de la misma no se muestran en detalle, en cambio son representadas en una “etiqueta química inteligente” que se puede expandir si es necesario.
- Defina nuevos Nicknames en ChemDraw que sean apropiados a su investigación



Herramienta para dibujar Secuencias

- Dibuja secuencias de Amino Acidos, DNA, RNA.

- Dibuja secuencias de péptidos y nucleótidos
- Modos Diferentes:
 - Opción 1: Amino ácidos representado con una letra.
 - Opción 2: Amino ácidos representados con tres letras.
 - Opción 3: dibujador de ADN.
 - Opción 4: dibujador de ARN
- Nomenclatura Termini son automáticamente dibujados de acuerdo con la secuencia dibujada.
- Se puede expandir y contraer una o múltiple secuencias y etiquetas.



TLC Plate, Tablas, Flechas y lapicera

- Facilita el dibujo

Ad... X

	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{H}_2\text{N}-\text{CH}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$

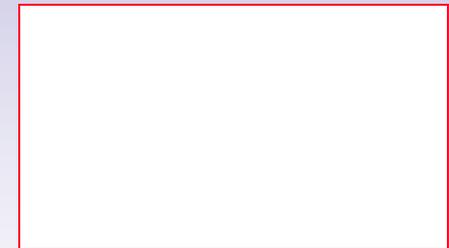
TLC Plate drawing area with shapes: teardrop, vertical line, circle, large solid circle, small circle with dot.

Arrows

Arrows palette containing various arrow shapes: straight, curved, and arrows with different heads and tails.

Pen

Pen drawing area containing a single, continuous, wavy black line.

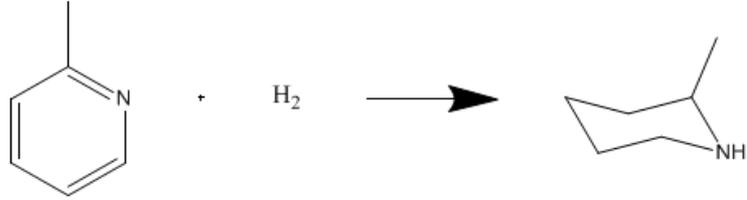


ChemBioDraw calcula estequiometría

- Evite errores costosos-

Herramienta: “Stoichiometry Grid”

- Menu Structure → Analyze Stoichiometry
- Auto-calcula los valores estequimétricos donde es posible hacerlo
- Los datos estequimétricos se sincronizan automáticamente cuando cambia algo en la reacción



Reactants

Formula	C₆H₇N	H₂
MW	93.13	2.02
Limiting?	Yes	No
Equivalents	0.84	
Sample Mass	34.00g	814.84mg
%Weight	93.00%	
Molarity		
Density		
Volume		
Reactant Moles	339.54mmol	404.21mmol
Reactant Mass	31.62g	814.84mg

Products

Formula	C₆H₁₃N
MW	99.17
Equivalents	
Expected Mass	40.09g
Expected Moles	404.21mmol
Measured Mass	
Purity	
Product Mass	
Product Moles	
%Yield	

La más alta calidad gráfica y representación química

- Optimización de Estructuras y Reacciones.

- Con un click la opción “*Structure or Reaction Cleanup*” provee representaciones más elegantes, nítidas y exactas
- Se pueden fijar los largos de enlace y ángulos.
- El algoritmo “clean-up” ha sido mejorado considerablemente en versión 12.

*Eliminando superposición de enlaces:
por ejemplo anillos puente*

Selection of base ring
in cyclic system

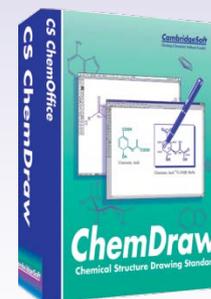
Vertically
oriented
carbonyls

Positioning of
hashed and
wedged bonds

Convenciones de representación química

- Mejoras en la representación estereoquímica

- ChemDraw 12 ha sido mejorado para reconocer los estilos comunes de dibujo que representan la estereoquímica tetraédrica sin necesidad de enlaces con clásica representación en estero.
- Los cambios son consistentes con la últimas recomendaciones de la IUPAC para representación estereoquímica.
- Por ejemplo:



Prediciendo Propiedades Químicas con ChemBioDraw

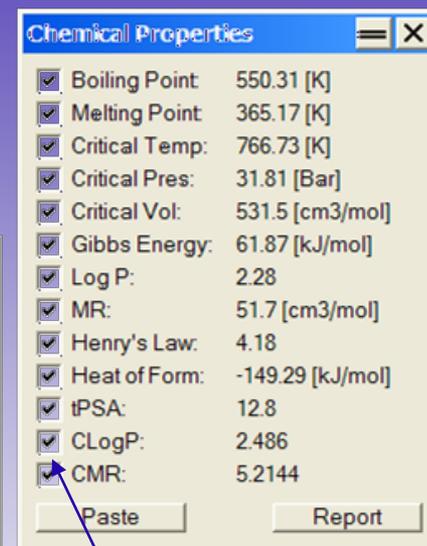
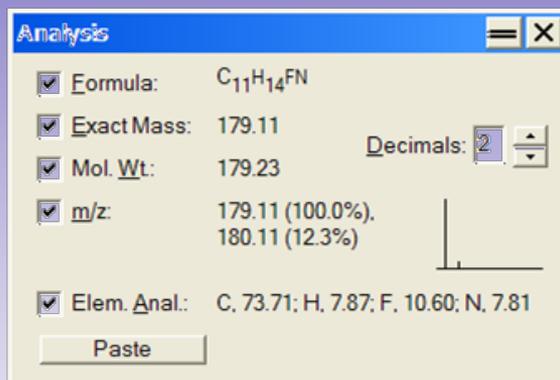
– Una forma rápida de verificar sus compuestos.

- **Análisis estructural (actualizado en tiempo real)**

- Fórmula
- Masa Exacta
- Peso Molecular
- Distribución Isotópica
- Análisis Elemental

- **Propiedades Fisicoquímicas**

- Punto de ebullición
- Punto de Fusión
- Temp Crítica, Pres, Vol
- Energía de Gibbs
- LogP
- MR
- Ley de Henry
- Calor de Formación
- CLogP
- CMR

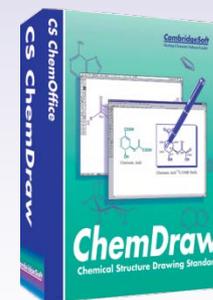
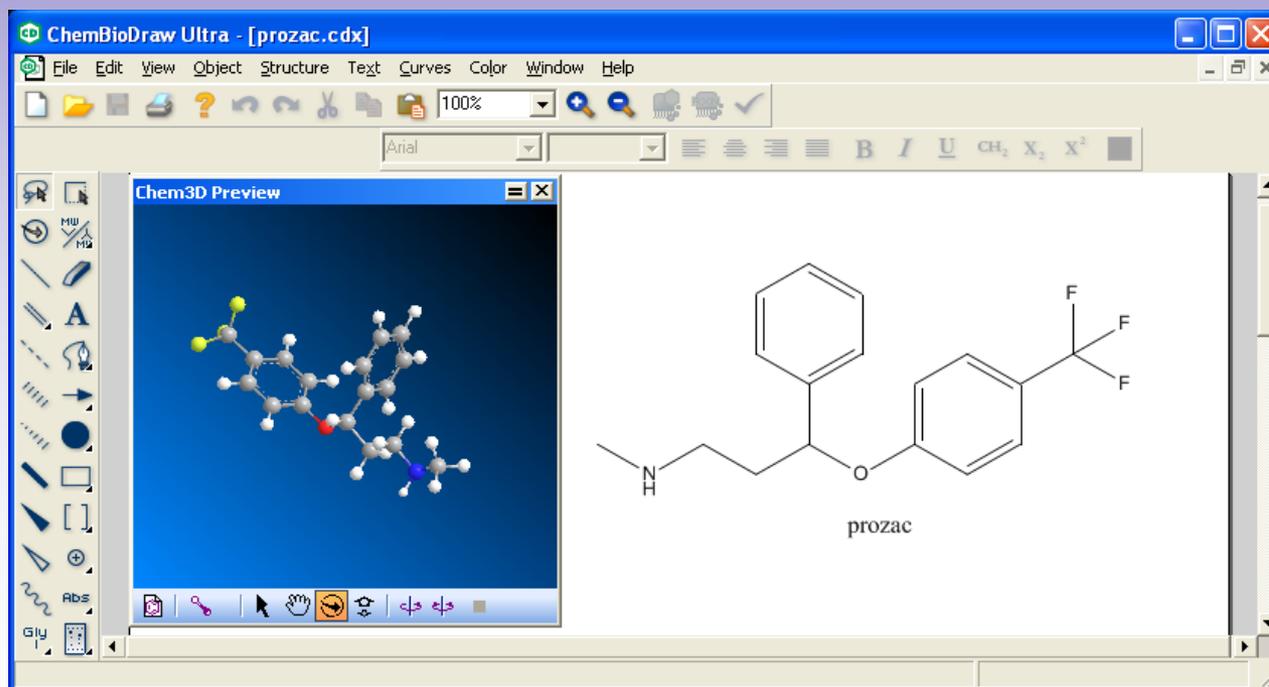


**Topological Polar Surface, tPSA fue adicionado en versión 9.0*

ChemBio3D LiveLink

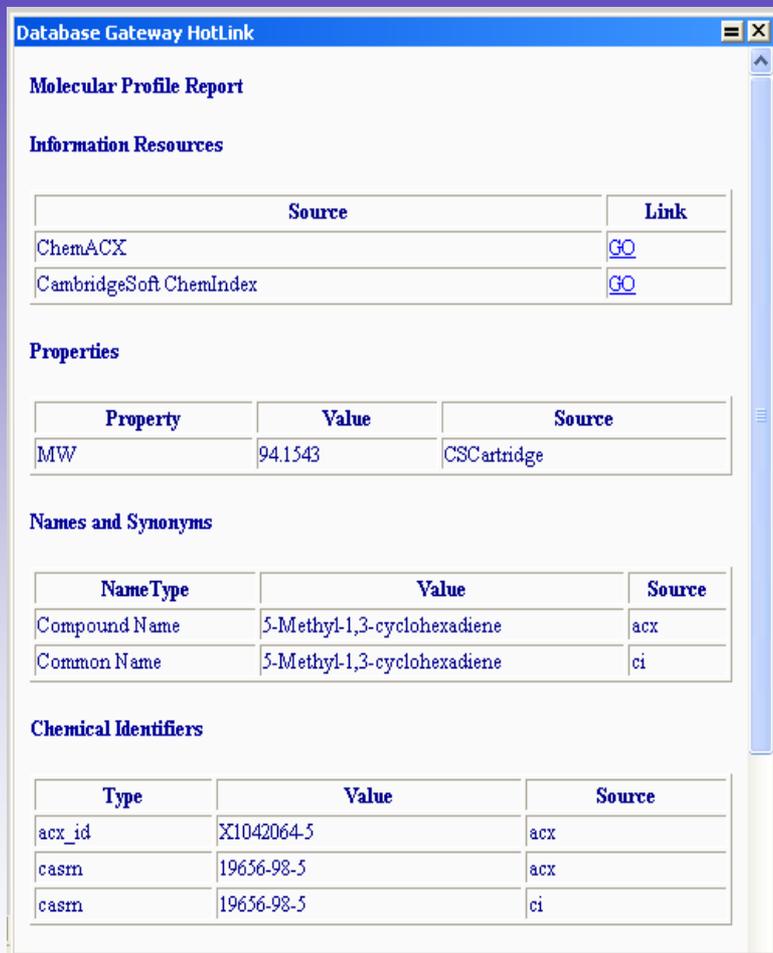
-Visualización 3D

- “View 3D Preview” es un nuevo ítem en el menú “View”
- Una ventana separada flotante aparece mostrando el modelo en 3D (como la genera Chem3D)
- Para que funcione, una versión actual de Chem3D debe ser instalada



Database Gateway Livelink

- *Búsqueda de datos en base de datos estructurales en tiempo real.*



The screenshot shows a web browser window titled "Database Gateway HotLink". The main content is a "Molecular Profile Report" for a chemical compound. The report is organized into several sections:

- Information Resources:** A table with two rows. The first row has "ChemACX" in the "Source" column and a "GO" link in the "Link" column. The second row has "CambridgeSoft ChemIndex" in the "Source" column and a "GO" link in the "Link" column.
- Properties:** A table with three columns: "Property", "Value", and "Source". The first row contains "MW", "94.1543", and "CSCartridge".
- Names and Synonyms:** A table with three columns: "NameType", "Value", and "Source". The first row contains "Compound Name", "5-Methyl-1,3-cyclohexadiene", and "acx". The second row contains "Common Name", "5-Methyl-1,3-cyclohexadiene", and "ci".
- Chemical Identifiers:** A table with three columns: "Type", "Value", and "Source". The first row contains "acx_id", "X1042064-5", and "acx". The second row contains "casm", "19656-98-5", and "acx". The third row contains "casm", "19656-98-5", and "ci".

- **Búsqueda en tiempo real**
 - Busca tan pronto como dibuja.
 - Busca en todas la bases de datos de CS.
 - Busca bases de datos internas
- **Analizar resultados en detalle**
 - Clickear un resultado para analizar la fuente y los detalles.
 -

Predicción de RMN usando ChemDraw

– Ayuda a confirmar Estructuras Químicas

- ^1H NMR incluyendo “patrones de separación de picos
- Calcula espectros de ^{13}C NMR



Predicción de RMN usando ChemDraw

– Ayuda a confirmar Estructuras Químicas

- ^1H NMR incluyendo “patrones de separación de picos
- Calcula espectros de ^{13}C NMR

Protocol of the H-1 NMR Prediction:

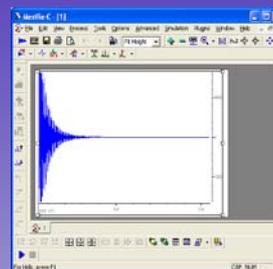
Node	Shift	Base + Inc.	Comment (ppm rel. to TMS)
OH	3.58	2.00	alcohol
		1.58	general corrections
CH	1.47	1.51	cyclopentane
		-0.02	2 beta -C from methine
		-0.02	2 beta -C from methine
CH2	1.60;1.345000	1.51	cyclopentane
		-0.04	1 beta -C from methylene
CH2	1.60;1.345000	1.51	cyclopentane
		-0.04	1 beta -C from methylene
CH	3.25	1.50	methine
		1.73	1 alpha -0

MestRe Nova Lite procesa 1D NMR Spectra

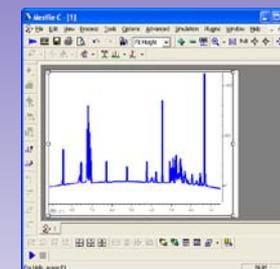
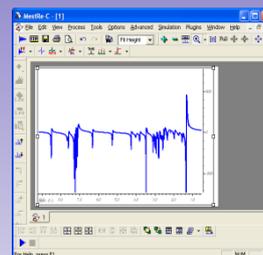
- Se pueden analizar resultados de NMR en segundos

MestReNova Lite Importa archivos de

Formato de data	Proveedor	Dimensions
VXR/Unity/Inova	Varian	1D **
Gemini/VXR	Varian	1D
XWIN-NMR/UXNNMR	Bruker	1D **
Aspect 2000/3000	Bruker	1D
Win-NMR	Bruker	1D
JEOL GX/EX	JEOL	1D
CDFE Nuts	AcomNMR	1D **
JCAMP-DX 5.0	IUPAC	1D
NTNMr	Tecmag	1D
SwaN-MR	Menarini	1D
SIEMENS NMR	Siemens	1D
SIEMENS NMR	Nicolet/GE	1D



Correccion de Base



Analisis

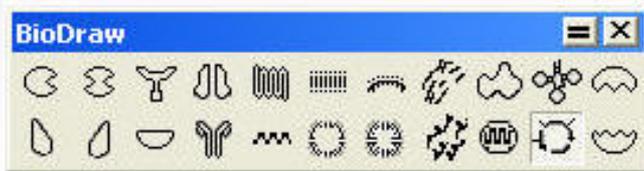
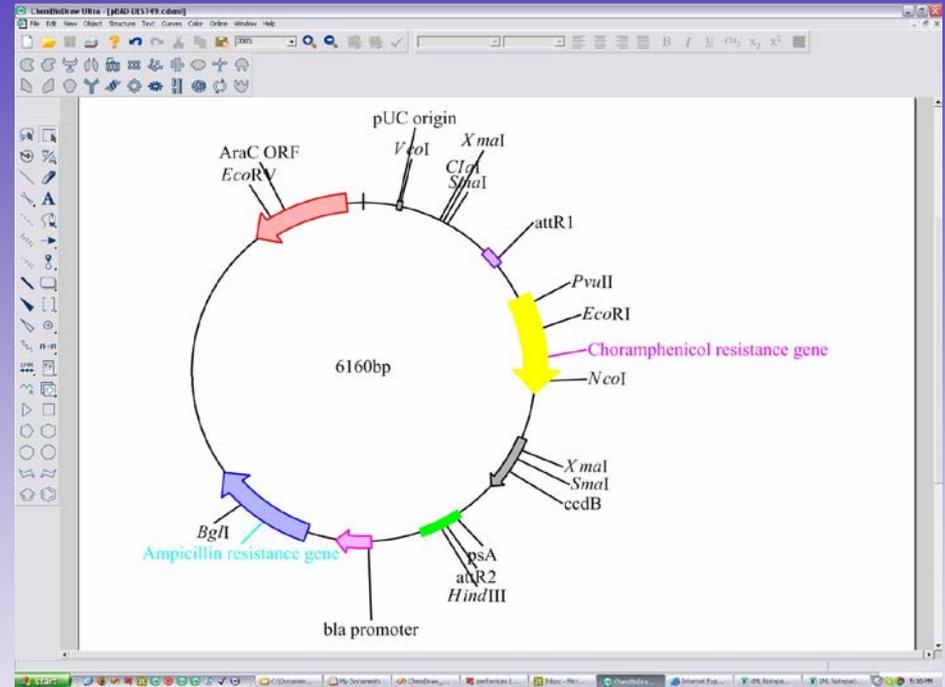


- Procesado y análisis de RMN básico. Ideal para cuando se hacen muchos experimentos de RMN como rutina.
- Complementa las predicciones básicas de RMN de ChemDraw.

BioDraw :Herramienta de Dibujo Biológico

- Diseñado para la ilustración de procesos biológicos.

- tRNA
- Ribosoma
- Mapa de Plásmidos
- Cada filamento de la doble hélice de DNA se puede seleccionar modificar individualmente
- Cada filamento y cilindros de proteínas pueden separar y modificar individualmente.



Dibujos químicos y biológicos integrados

- Facilita la Comunicación entre Científicos

Dibuja Mecanismos biológicos (Biological Pathways)

Enzimas de uno o dos substratos

Receptor

Ion Channel

Proteínas helicales

membranas lineales

Membranas en Arco

Complejos de Golgi

Nubes

G-Proteinas (alpha, beta or gamma subunit)

Immunoglobina

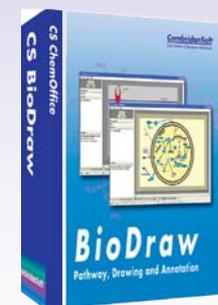
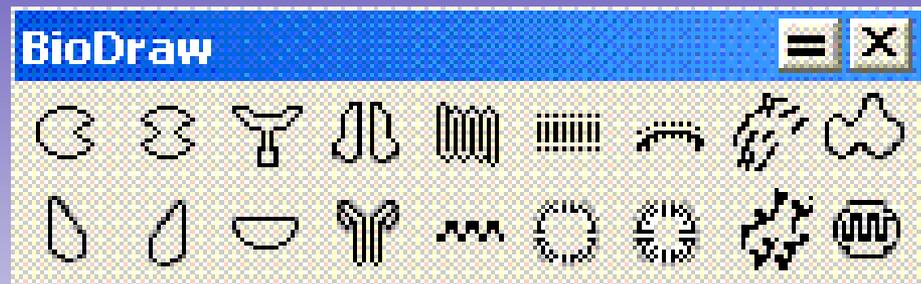
DNA

Micelas

Membrana Elíptica

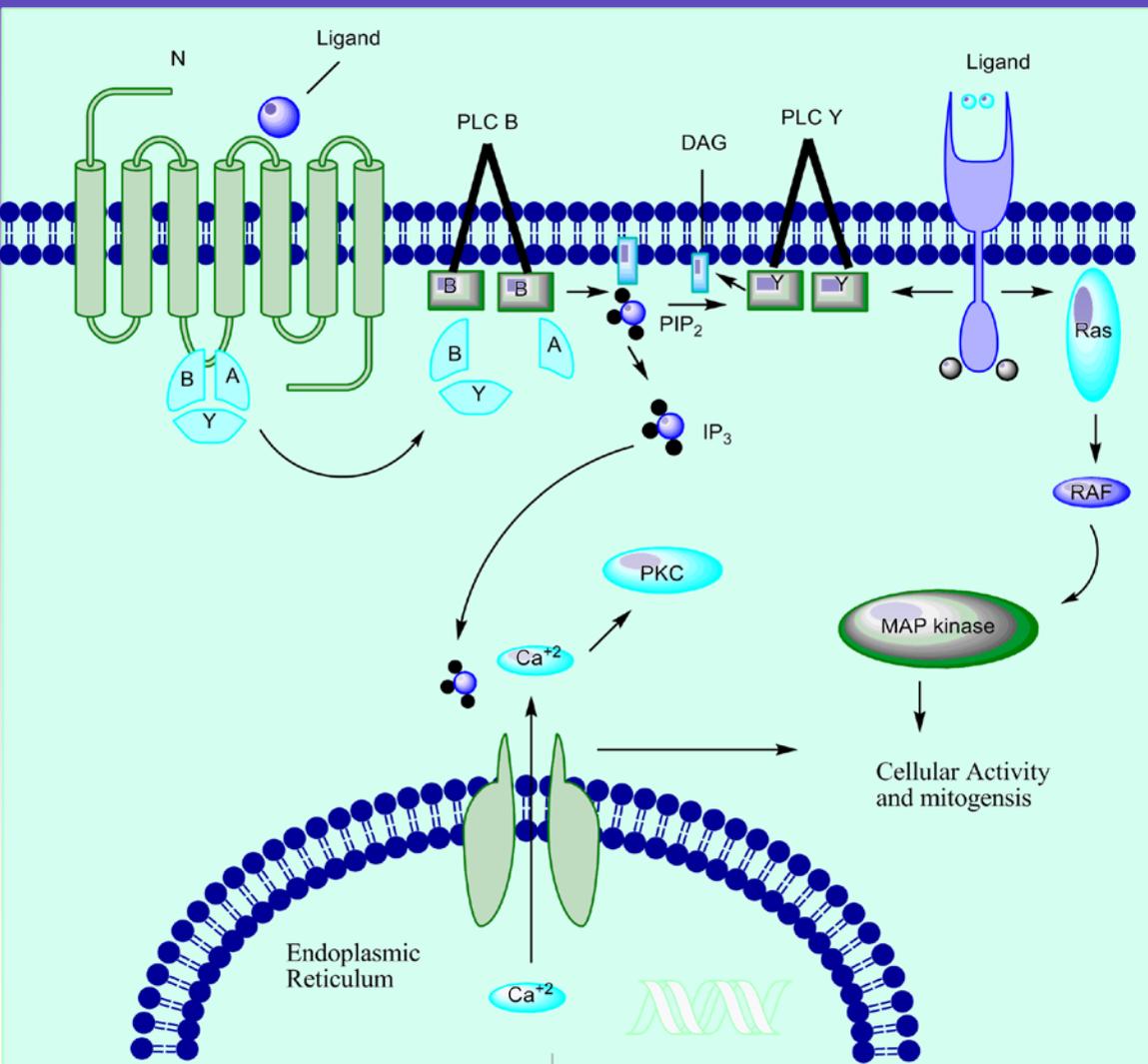
Retículo Endoplasmico

Mitocondria



Dibujos químicos y biológicos integrados

- Facilita la Comunicación entre Científicos



- *Las propiedades de BioDraw están totalmente integrados en ChemBioDraw Ultra*
- *Es una excelente herramienta de colaboración entre científicos.*

ChemBioDaw para Excel

ChemDraw for Excel

- Store, Search, Organize Chemicals in Excel -

8446910945962358 - ChemDraw for Excel

Home Insert Page Layout Formulas Data Review View Add-Ins Acrobat

Cut Delete Copy ChemOffice12 Paste Sort Menu Commands Toolbar Commands Custom Toolbars

ChemDraw for Excel Add-In

1	Structure	MolfileName	PUBCHEM_ATOM_I	PUBCHEM_ATOM_I	PUBCHEM_BONDAI	PUBCHEM_BOND_I	PUBCHEM_BOND_U	PUBCHEM_CACTVS	PUBCHEM_CACTVS	PUBCHEM_CACT
						10 13 8				
						11 14 8				
						12 13 8				
						12 14 8				
						6 10 8				
2	C ₁₃ H ₁₅ NO ₂ S	6603741	0		0	6 11 8				
						20 22 8				
						20 23 8				
						21 24 8				
						21 25 8				
						22 26 8				
						23 27 8				
						24 29 8				
						25 30 8				
						26 28 8				
						27 28 8				
						29 31 8				
3	C ₁₇ H ₁₇ F ₃ N ₃ O	3233846	0		0	30 31 8		0	757	9
						10 12 8				
						10 14 8				
						11 15 8				
						12 16 8				
						13 21 8				
						14 22 8				
						15 23 8				
						16 24 8				
						21 23 8				
						22 24 8				
						9 11 8				

Chemically active structure

Substructure search available utilizing ChemDraw toolbar

Normal Similarity

Search Type

Full Structure Sub Structure

Filter Type

Include hits Exclude hits

Formula Query

R-Group Analysis Search Clear All

Adicionando Inteligencia Química a Excel

- Cálculo de Propiedades química de múltiple estructuras

ChemDraw/Excel

- Adiciona estructuras químicas y otro tipo de datos de ChemDraw, MDL, archivos SD o a ChemFinder base de datos a una hoja Excel.
- Convertir Nombres o SMILES en estructuras.
- Calcular propiedades fisicoquímicas de estructuras químicas.
- Química combinatoria en Excel
 - Generación automática de productos a partir de reactivos genéricos.

Propiedades

Funcion

LogP	CHEMPROP.LOGP
Molar Refractivity	CHEMPROP.MR
Henry's Law Constant	CHEMPROP.HENRY.LAW.CONSTANT
Boiling Point	CHEMPROP.BOILING
Freezing Temperature	CHEMPROP.FREEZING
Critical Temperature	CHEMPROP.CRITICAL.TEMP
Critical Pressure	CHEMPROP.CRITICAL.PRESSURE
Critical Volume	CHEMPROP.CRITICAL.VOLUME
Heat of Formation	CHEMPROP.HOF
Gibbs Free Energy	CHEMPROP.GIBBS
Ideal Gas Thermal Capacity	CHEMPROP.IDEAL.GAS
tPSA	CHEMPROP.TPSA

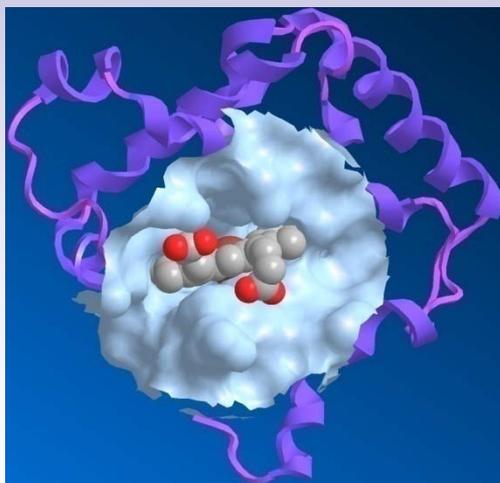
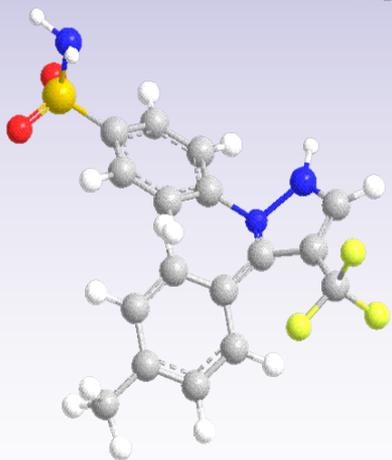
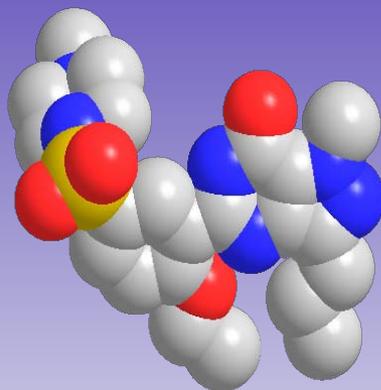
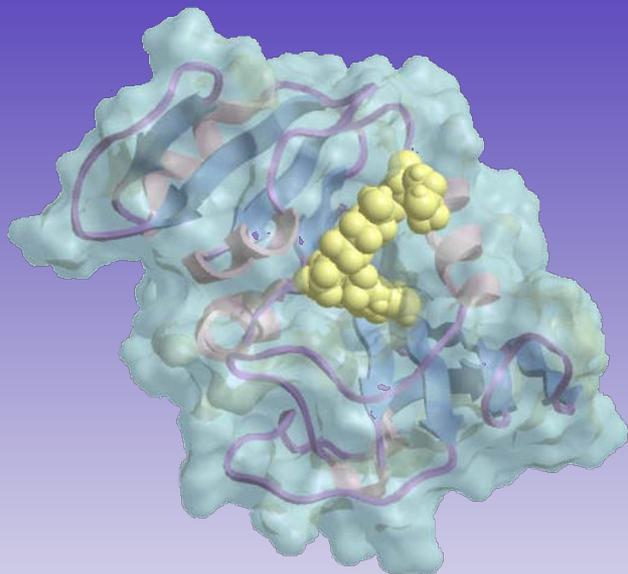
ChemBio3D

Visualización de alta calidad

- Hacia una comprensión detallada de sistemas químicos.

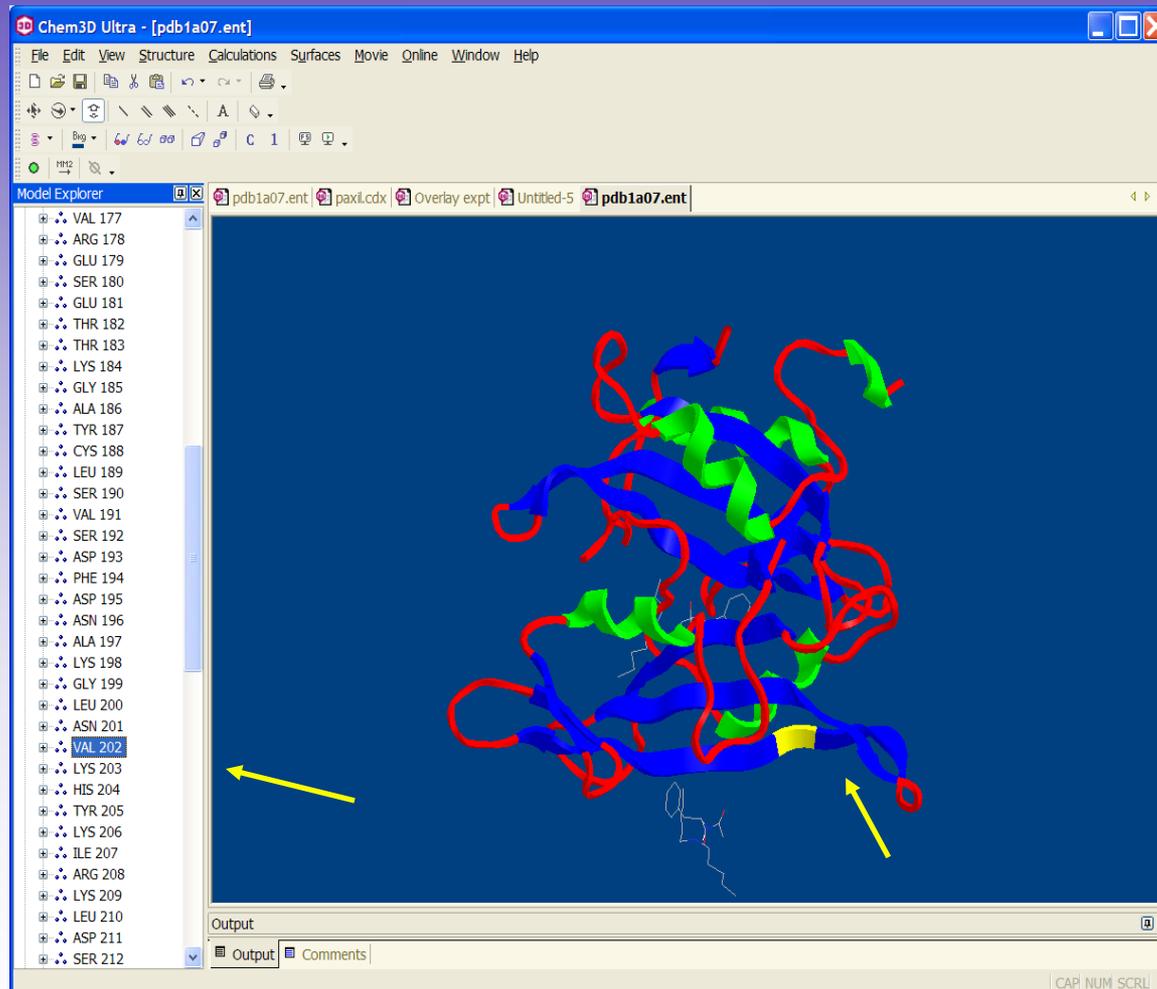
ChemBio3D Ultra

- Grupos de químicos, biólogos pueden visualizar estructuras químicas a través de herramientas que son de alta calidad y fácil de usar.
- Visualice resultados de química computacional- asiste en el diseño de nuevos compuestos.
- Diagramas de cintas de Proteínas y Ácidos Nucleicos proveen una visión profunda de la estructuras terciarias y cuaternarias de proteínas y complejos proteicos.
- Conexión directa con el PDB



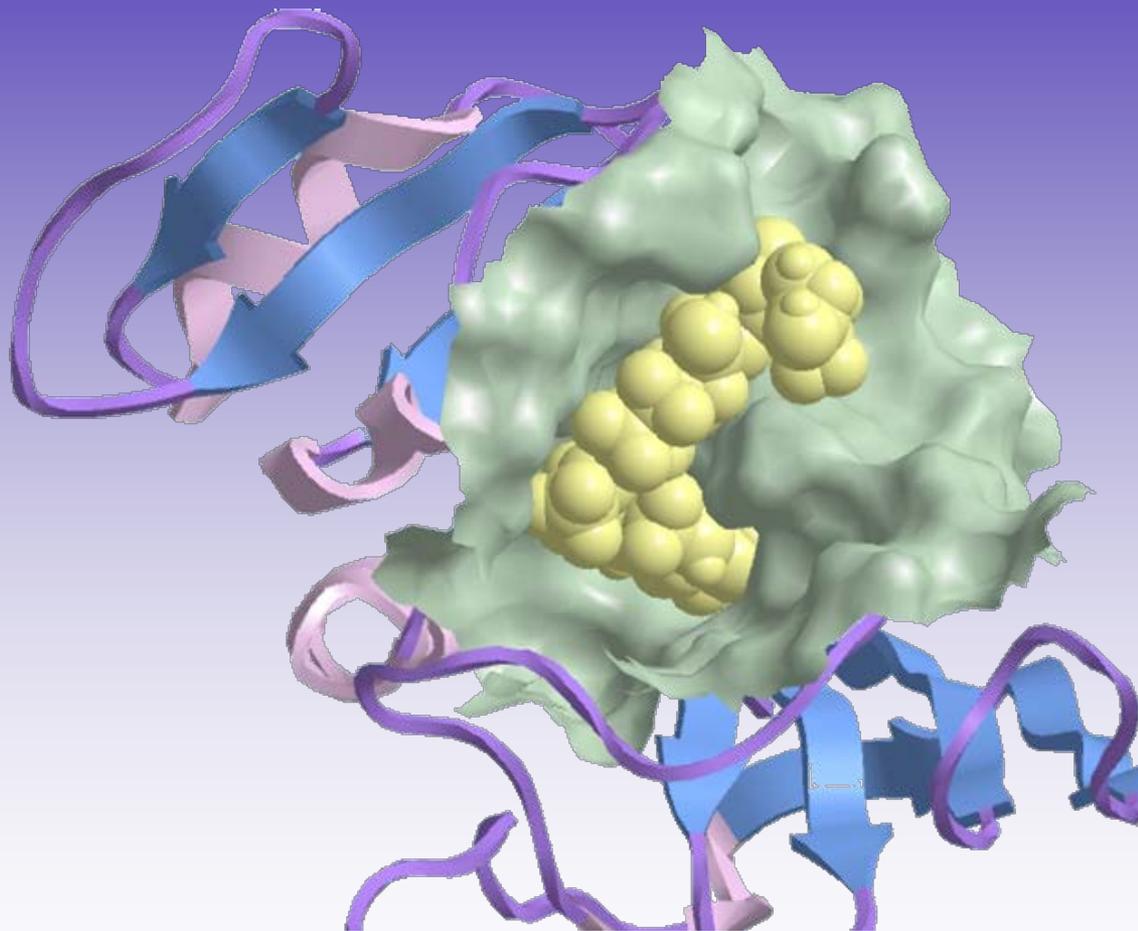
Model Explorer

- La forma eficiente de explorar estructuras complejas-

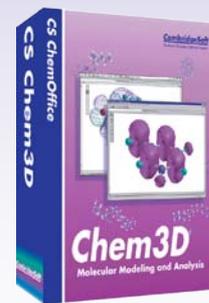


Superficies

- Visualización de sitios activos -

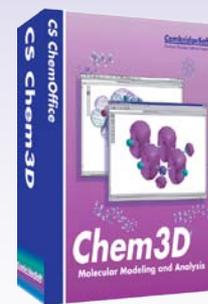
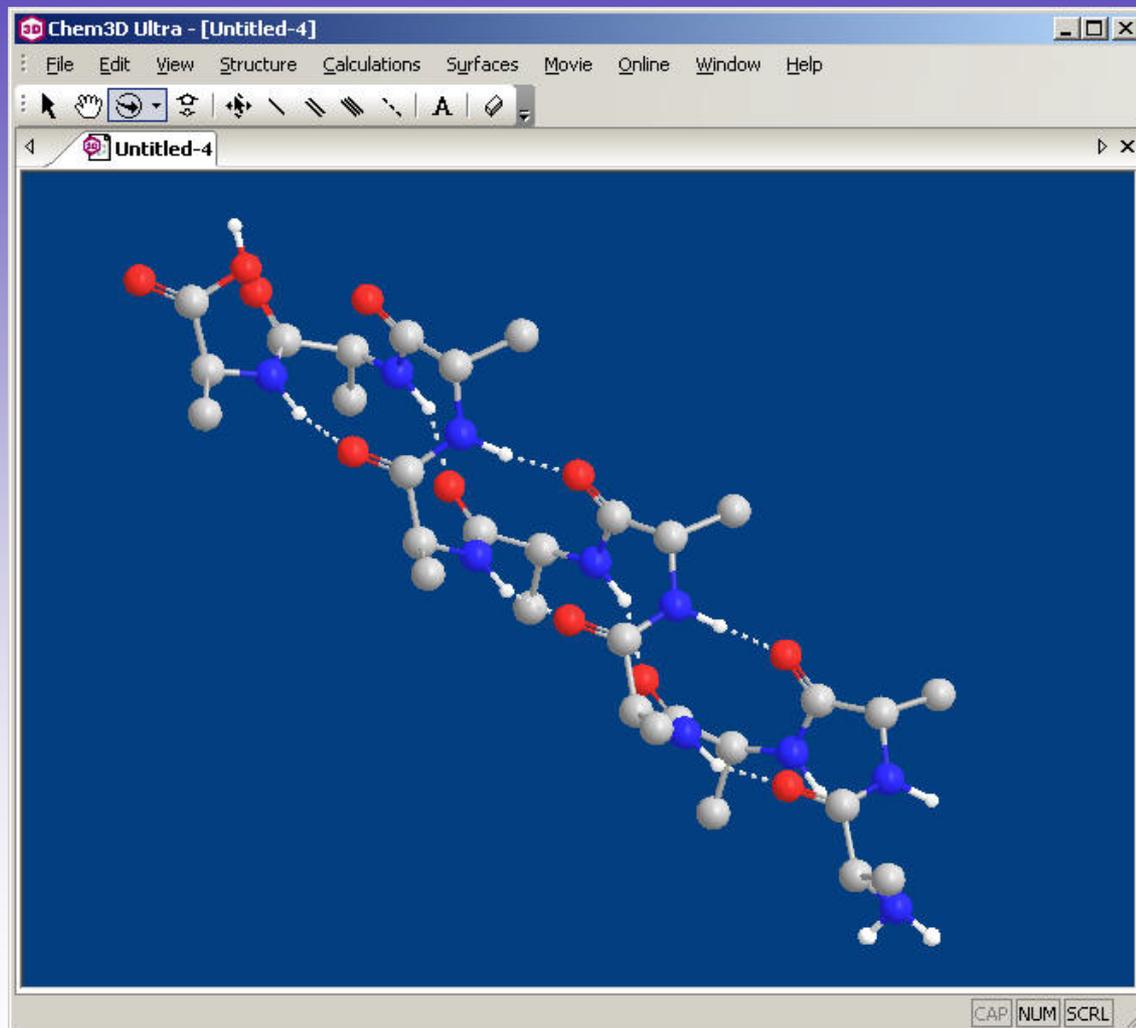


A Connolly Surface which excludes the ligand



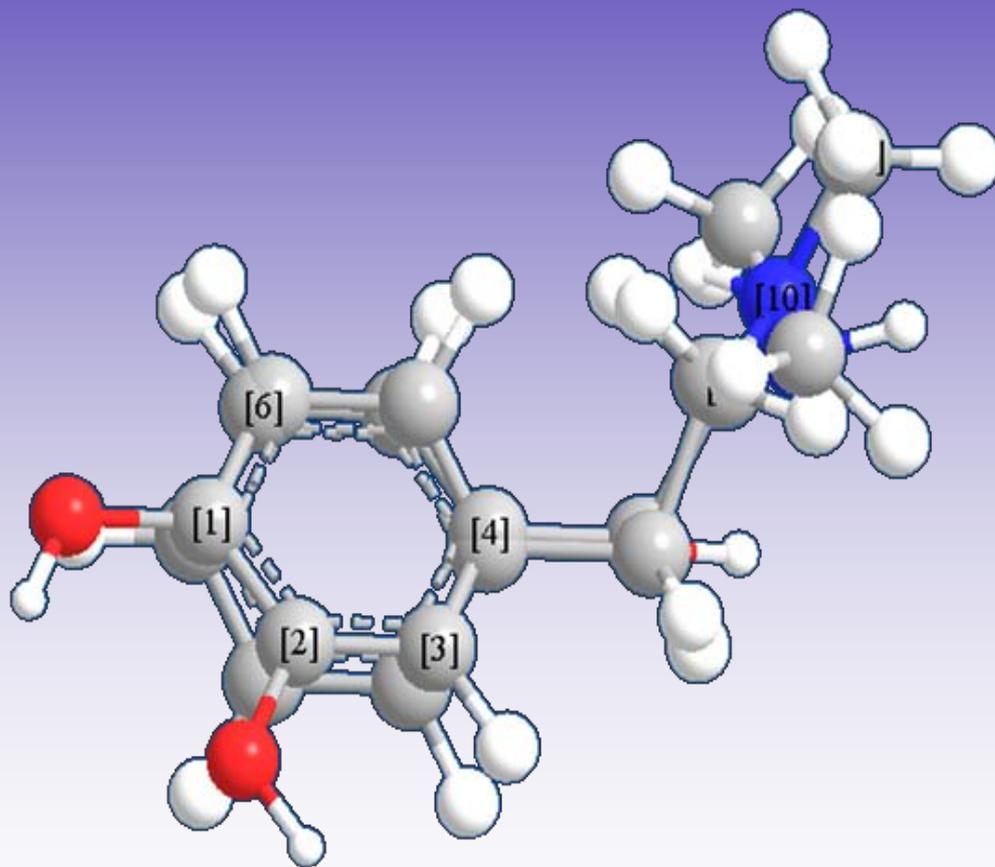
Muestra los enlaces de puente de Hidrógeno

- Puede mostrar en forma selectiva los enlaces de interés-



Superposición automática de moléculas

- Superposición rígida es muy simple -



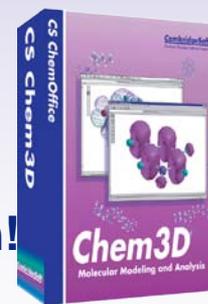
Modelos en vivo en PPT

- Facilitando la comunicacion-

« Chem3D Enterprise »



- Incorpore modelos de ChemBio3D en PowerPoint
- Rote y zoom modelos ChemBio3D mientras da una presentacion!
- Si no tiene ChemBio3D: cree un “animated gift”



Extensiones de ChemBio3D .

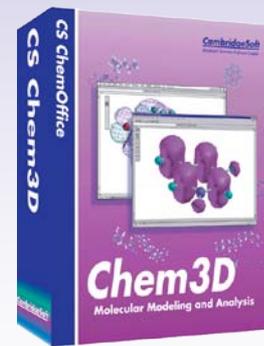
- Integración con GAMESS, MOPAC, Gaussian y Jaguar

Cálculos ab-initio y semiempíricos usando:

- MOPAC
- GAMESS
- Gaussian*
- Jaguar*

Que cálculos podemos hacer?

- Minimización de energía
- Cálculos de propiedades electrónicas
- Predicción de espectros de NMR, IR y Raman
- Superficies: Superficie de densidad de carga total, Superficie de Densidad De Spin total, Superficie de potencial Molecular Electrostático, y superficie de orbitales Moleculares.

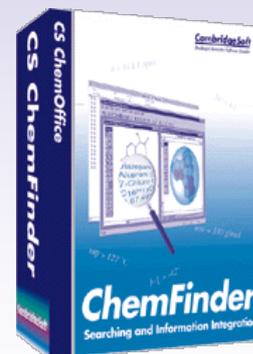


ChemBioFinder

ChemBioFinder

- Cree su propia base de datos químicos y biológicos.

- Construir y visualizar su propia base de datos químicos y biológicos.
- Crear sus propias planillas.
- Almacenar estructuras químicas, propiedades físicas notas y tablas de datos.
- Almacena datos biológicos
- Integrado con ChemBioDraw.
- Búsqueda de datos usando:
 - Estructuras químicas(incluyendo sub-estructuras)
 - Búsqueda de texto con “Wild card”
 - Búsqueda numérica.

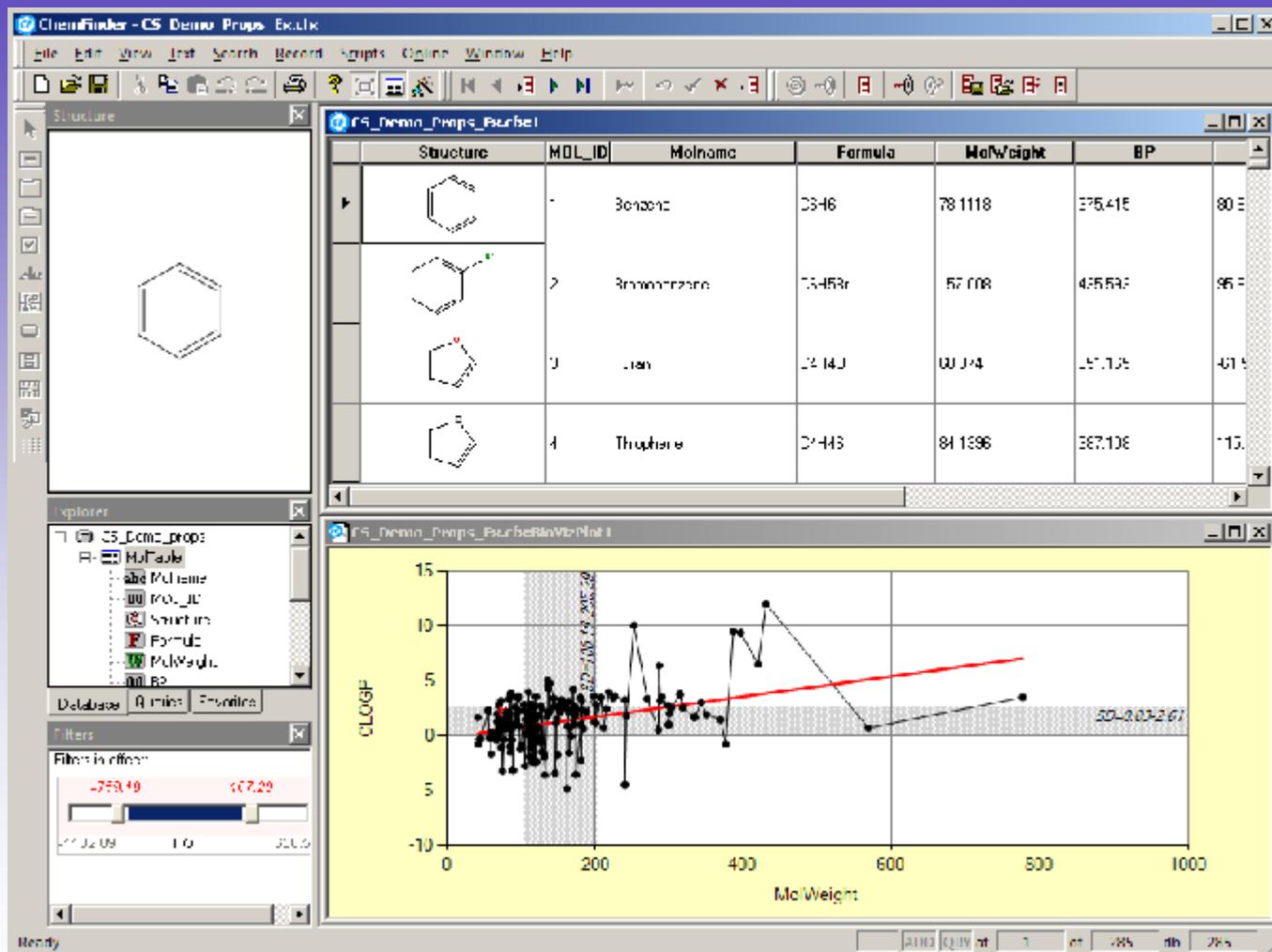


Obteniendo información de datos - Usando BioViz en ChemBioFinder

Visualización y análisis de data directamente en ChemBioFinder

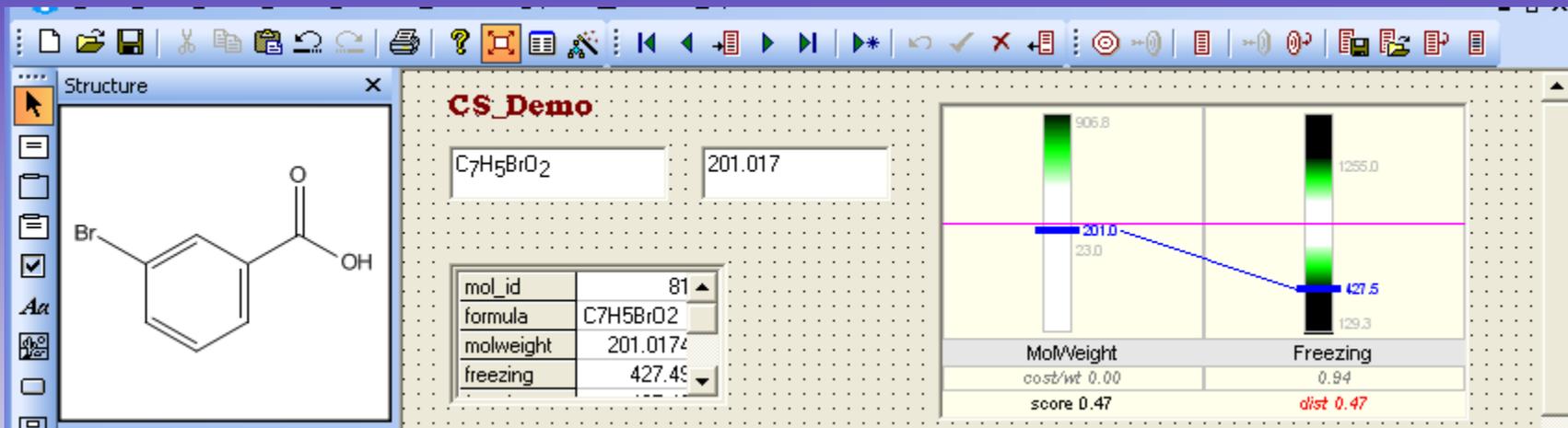
-Ninguna necesidad de usar otras aplicaciones de software

- Los análisis son almacenados con la plantilla



Perfilando compuestos

- Comparando estructuras basado en sus propiedades.



Perfilando compuestos

Compare visualmente y organizar estructuras basados en valores de propiedades específicas y el perfil asociado con cada propiedad.

E-Notebook: Bitácora electrónica de Laboratorio

E-Notebook Ultra: version personal (desktop)

- Elimina horas de trabajo escribiendo y buscando resultados -

Work Offline
Functionality

Batch
Explorer

Reaction
Section

The screenshot displays the E-Notebook Ultra software interface. At the top, there is a menu bar (File, Edit, View, Tools, Help) and a toolbar with navigation buttons (Back, Forward) and a search bar. The main window is titled 'Untitled Chemistry Notebook-001'. On the left, a 'Batch Explorer' tree view shows a hierarchy of folders including 'User Configuration', 'MedChem AutoText Definitions', 'Reactants Folder', 'Salt Codes Folder', 'Solvents Folder', 'Tasks', 'Templates', 'Rendering Folder', and 'Offline'. Below this is a 'History' table with columns for 'Action' and 'Date'. The central area shows a chemical reaction: CCNCCOC1=CC=C(C(F)(F)F)C=C1.ClC1=CC=CC=C1>>CCNCCOC1=CC=C(C(F)(F)F)C=C1.C1=CC=CC=C1. Below the reaction is a 'Reactants & Products' table. The 'Reactants & Products' table has columns: Reactant, MF, Limit?, MW, Eq, Moles, Sample Mass, Vol, Molarity, d, % Wt, FM. The 'Product' table has columns: Product, MF, Actual Mass, Actual Mol, Yield, Purity, MW, Eq, Theo Mol, Theo Mass, FM. At the bottom, there is a 'Preparation' section with a text editor containing a template for reaction conditions and a 'Solvents' table with columns: Name, Ratio, Volume. The 'Reaction Conditions' section includes fields for Reaction Molarity, Pressure, and Temperature.

Reactant	MF	Limit?	MW	Eq	Moles	Sample Mass	Vol	Molarity	d	% Wt	FM
1 N-methyl-3-(4-(trifluoromethyl)phenoxy)propan-1-amine	C11H14F3NO	<input checked="" type="checkbox"/>	233.230	1.000							233.230
2 hydrogen chloride	ClH	<input type="checkbox"/>	36.461	1.000							36.461
3 benzene	C6H6	<input type="checkbox"/>	78.112	1.000							78.112

Product	MF	Actual Mass	Actual Mol	Yield	Purity	MW	Eq	Theo Mol	Theo Mass	FM
1 N-methyl-3-phenyl-3-(4-(trifluoromethyl)phenoxy)propan-1-amine	C17H18F3NO					309.326	1.000			309.326

Name	Ratio	Volume

Reaction Conditions	
Reaction Molarity	
Pressure	
Temperature	

Navigation
Panel

Stoichiometry
Grid

Reaction
Conditions

Audit Trail

AutoText

E-Notebook: Configuración para Biología

- Interface "free-form" con una gran flexibilidad en la búsqueda de datos -

Ability to add as many sections as needed

Seamless integration with Microsoft Office 2007

Free-form drawing section

The screenshot displays the E-Notebook software interface. At the top, there is a menu bar (File, Edit, View, Tools, Help) and a toolbar with navigation and search icons. Below this is a document navigation pane on the left with options like 'New Section' and 'New ChemImage'. The main workspace contains a biological pathway diagram. The diagram shows a 'Growth Factor' binding to a receptor, leading to the conversion of tyrosine to 3,4-dihydroxyphenylalanine by the enzyme tyrosine hydroxylase. This process involves tetrahydrobiopterin and dihydrobiopterin, with the addition of O₂ and the release of H₂O. The pathway then branches into signaling molecules: PI₃K, PIP₂, PIP₃, PTEN, PDK-1, and ILK. On the right, an 'Integrin Receptor' is shown interacting with Shc1, Grb2, and Sos1, with PTEN also involved in the signaling cascade. A 'Metadata' section at the bottom left of the workspace shows fields for 'Date' and 'Document'. Red arrows point from external text annotations to specific parts of the interface: one to the document navigation pane, another to the document title bar, and a third to the main drawing area.

E-notebook Office 2007 Compatibility

- Work seamlessly with Office 2007 -

The screenshot displays the Microsoft Office 2007 interface. The title bar shows several open applications: Title Page, Restriction Digest SOP, MS PowerPoint Slideshow, Yeast Media, Transformant plates, pKate1 plasmid map, MS Excel Spreadsheet, and Image. The ribbon is set to the 'Slide Show' tab, with sub-tabs for Home, Insert, Design, Animations, Slide Show, Review, View, Adobe Presenter, and Acrobat. The ribbon includes groups for Clipboard, Slides, Font, Paragraph, Drawing, and Editing. On the left, the 'New Section' and 'Import/Export' buttons are visible. The main workspace shows a slide with a gel electrophoresis image. A yellow arrow points from the text 'Fragment shows confirmation of gene presence - XLO1' to a specific band in the gel. The gel image has lanes labeled 'Eco Bgl Mbo Eco Bgl Mbo' at the top. The bottom of the slide area contains the text 'Click to add notes'.

Fragment shows confirmation of gene presence - XLO1

Seguridad y Audit Trail

- Cumple con las reglas de la 21CFR Part 11 -

The screenshot displays the ELNAdmin interface for a SQL Server 12.0 Instance. The main window shows a notebook entry titled "Kate Sydney Biology Notebook - May 2009". The entry content is: "In this experiment, I will perform a restriction digest on a plasmid to confirm that a gene has been correctly spiced. I will then transform my plasmid into yeast and isolate successful transformants." The entry is listed in a table with columns for Name, Content, Status, Created, and Last Modified.

Name	Content	Status	Created	Last Modified
1 Kate Sydney Biology Notebook - May 2009-001	In this experiment, I will perform a restriction digest on a plasmid to confirm that a gene has been correctly spiced. I will then transform my plasmid into yeast and isolate successful transformants.	Open	08-May-2009	29-Jun-2009
2 Kate Sydney Biology		Open	26-Jun-2009	26-Jun-2009

At the bottom left, a History table shows the audit trail for the entry:

History	Date	Operator
Create	08-May-2009 3:21:59 PM -0400	ELNAdmin

A red arrow points to the History table, indicating the location of the audit trail.

Location of
audit trail

Inventory y BioAssay

Inventory Ultra

- Maneje su inventario de compuestos en su escritorio-

- Seguridad basada en SQL Server Role
- Modelo que identifica lugares físicos
- Audit Trail – reistra todos los cambio de Locations, Containers, and Substances
- Puede importar datos de Excel
- Integrado con ChemACX.com

Inventory Ultra

- configuracion intuitiva-

Container ID	Name	CAS	Substance	Barcode	Container Status	Expires On
1012	Sodium Anhydride			35	Available	2/21/2003
1126	Acetic anhydride	108-24-7	ACETIC ANHYDRIDE	165	Available	3/11/2004
1183	Bromofluoromethane	373-52-4	bromofluoromethane	224	Available	3/11/2004
1240	HF		HYDROFLUORIC ACID	283	Available	3/11/2004
1297	fluorobenzene	462-06-6	Fluorobenzene	342	Available	3/11/2004
1354	Tetramethyl ammonium hydr	75-59-2	TETRAMETHYLAMMONIUM H	401	Available	9/30/2002
1473	1,6-Hexanediamine	124-09-4	1,6-Hexanediamine	522	Available	3/12/2004
1493	POTASSIUM CYANATE	3327-22-8	POTASSIUM CYANATE	544	Available	3/12/2004
1509	Tubercidin	69-33-0	Tubercidin	560	Available	3/12/2004
1582	COPPER(I)-IODIDE	7681-65-4	COPPER(I)-IODIDE	635	Available	3/12/2004
1676	Ethyl formate	109-94-4	Ethyl formate	733	Available	3/12/2004

FLUOROBENZENE [Edit EH&S](#) [MSDS](#)

Environmental Health & Safety Data

EH&S Grp 1: EH&S Grp 2: EH&S Grp 3:

UN Number: Pkg Group: Refrigerated:

Health: Flammability: Reactivity:

OSHA Carcino: ACGIH Category: Sensitizer:

IARC Carcinogen:

EU Carcinogen:

(Note: displayed values are for this particular supplier & product, not the defaults for this substance) [Help](#)

Contents of one location

Tabs contain data for each substance

Inventory location hierarchy

Option to rectify contents of location

- New Location...
- Edit Location...
- Move Location...
- Delete Location...
- Rectify Contents...**
- New Container...
- Edit Container...
- Move Container...
- Delete Container...
- Duplicate Container...
- New Substance...
- MSDS
- Check Out Container...

Se conecta con ChemACX

- Puede acceder miles de compuestos disponibles comercialmente-

Inventory Manager

Preferences

Database
 Inventory ChemACX

Show only conflicting subs

Search Type
Substructure
Substructure
Exact structure
Tanimoto similarity

Substance

CAS Registry#:

ACX Number:

Molecular Formula:

Mol Wt Range:

Search

Ca

Search Substance

Search Results

Compound Name	CAS Number	Action
Cycloheptylamine	5452-35-7	Compound imported into Inventory

Supplier Name	Catalog	Action
Acros Organics - USA	11107	Add Supplier to Inventory

ACXPackID	Pack Size	Pack Rate	Action
6825595	25 g	39.4	Add to Cart
6842759	100 g	134.3	Add to Cart

Supplier Name	Catalog	Action
MP Biomedicals (formerly ICN Biomedicals, Inc.)	203875	Add Supplier to Inventory
CU Chemie Uetikon	A-2600	Add Supplier to Inventory
Fluka Chemical Corp.	28890	Add Supplier to Inventory
Lancaster Synthesis Inc.	L01699	Add Supplier to Inventory
Acros Organics	11107	Add Supplier to Inventory
Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.	C0679	Add Supplier to Inventory
Aldrich	C99604	Add Supplier to Inventory
Advanced Synthesis Technologies, S.A.	C282260000	Add Supplier to Inventory

Shopping Cart

Compound N	CAS Num	Supplier Name	Required On	Required At	ACX Pack ID	Pack Size	Quantity	Rate	Action
Cycloheptyl...	5452-35-7	Acros Organics...	06/30/2009	Click to Set Loca...	6825595	25 g	1	39.4	Remove from C...

Save Cart

Close

Search the ChemACX database or your Inventory database

Results can be added to your shopping cart for manager approval + ordering

Qué es BioAssay?

Importa y almacena datos de ensayos biológicos

Manejo automático de procedimientos de ensayos biológicos

Gráficos y “heat maps”

Manipulación matemática y análisis de los ensayos.

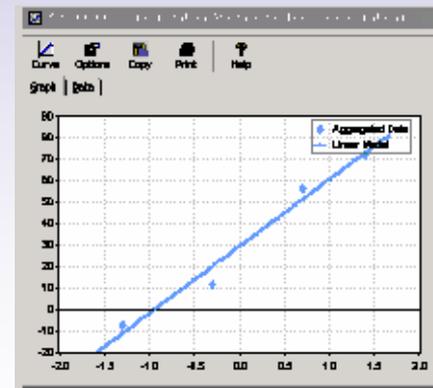
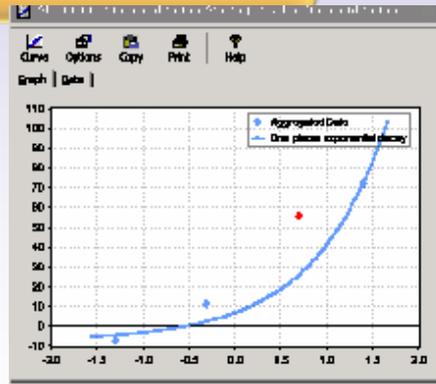
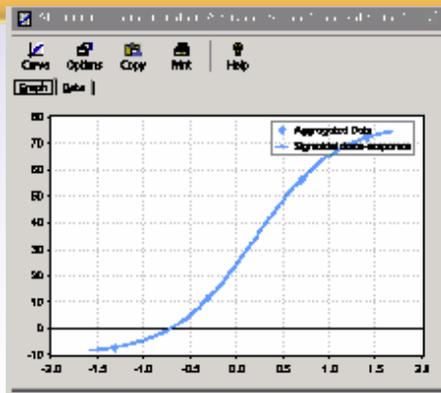
Wells - Contains data for each well

Table Plate MultiPlate Graph: g1

Actions Browse Edit Refresh Print Export Help

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
A												
B												
C									731783 6	884029 9	833994 0	821132 9
D	808447 4	919178 2	838250 2	708708 3	571905 5	841324 9	811846 5	852350 4	946312 8	104064 55	863159 1	741555 0
E	784677 4	874753 5	102131 59	991002 3	871038 5	102781 50	859994 6	813644 2	859689 5	967130 6	875509 2	938801 3
F	900981 4	930033 9	939341 6	822430 9								
G												
H												

Raw Value



Cómo funciona BioAssay ?

Setup “Plate”

- Define que tipo de plate se esta utilizando (Ex: 96-well, 384-well)

Setup “Well”

- Define que sustancia hay en cada “well” (Ex: Empty, compound, negative control, positive control)

Setup “Protocol”

- Define que hacer con los datos, una vez que han sido importados

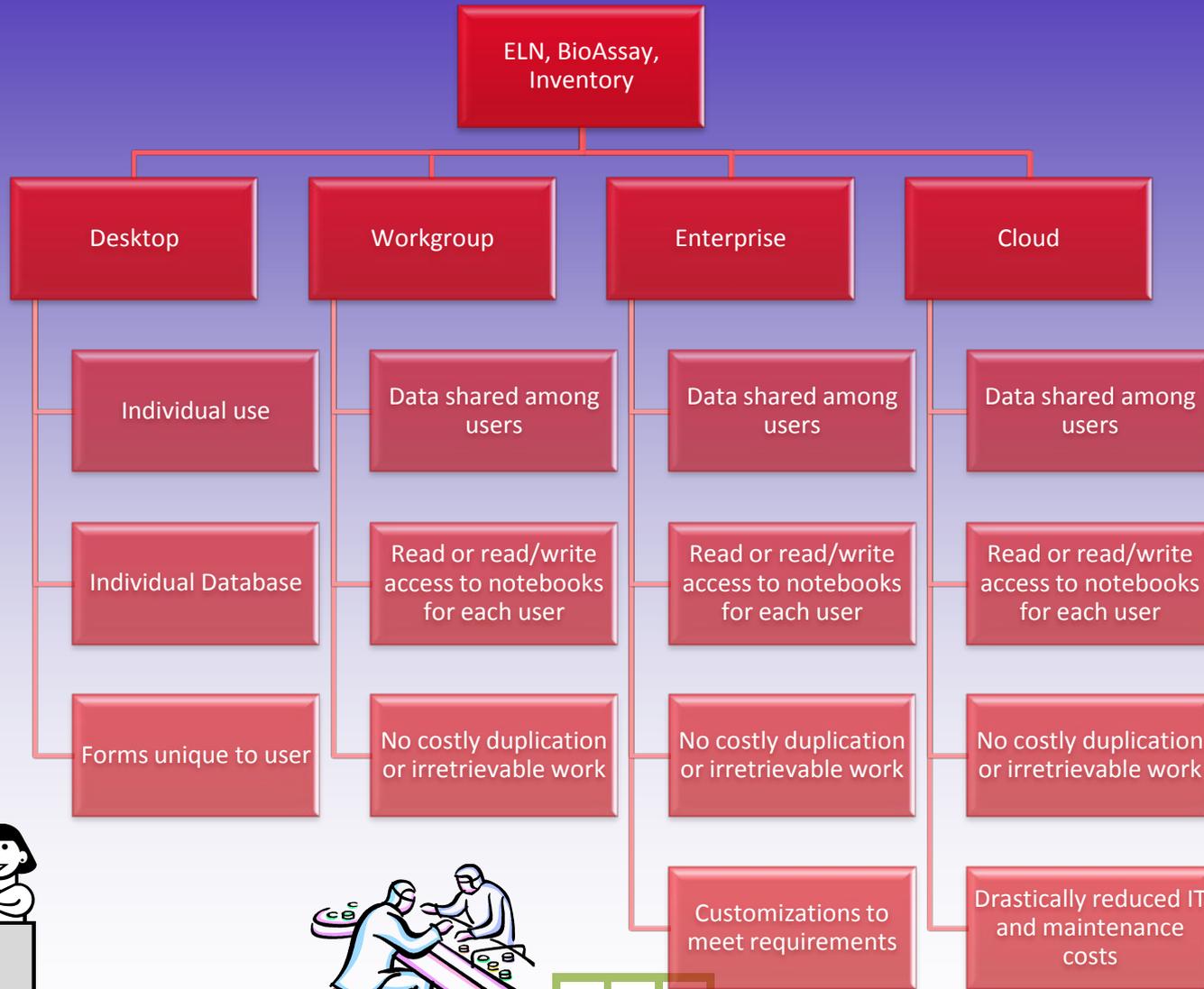
Datos “Raw”

- Pueden ser practicamente de cualquier tipo y pueden esta en fomato de plate o de columna o en un formato que Usted defina.

Que sistema es apropiado para nuestra institucion?

Compartiendo informacion?

- Este análisis se aplica para ELN, BioAssay, Inventory -



Beneficios de Compartir data

BioAssay

Name	Unit	Unit Factor	Assay 1	Assay 2	Assay 3	Assay 4	Assay 5	Assay 6	Assay 7	Assay 8	Assay 9	Assay 10
N. 1.0 A01	Compound	AB-000001	20	107233	115.764000	AB-000001						
N. 1.0 A02	Compound	AB-000002	20	107233	115.764000	AB-000002						
N. 1.0 A03	Compound	AB-000003	20	107233	115.764000	AB-000003						
N. 1.0 A04	Compound	AB-000004	20	107233	115.764000	AB-000004						
N. 1.0 A05	Compound	AB-000005	20	107233	115.764000	AB-000005						
N. 1.0 A06	Compound	AB-000006	20	107233	115.764000	AB-000006						
N. 1.0 A07	Compound	AB-000007	20	107233	115.764000	AB-000007						
N. 1.0 A08	Compound	AB-000008	20	107233	115.764000	AB-000008						
N. 1.0 A09	Compound	AB-000009	20	107233	115.764000	AB-000009						
N. 1.0 A10	Compound	AB-000010	20	107233	115.764000	AB-000010						
N. 1.0 A11	Compound	AB-000011	20	107233	115.764000	AB-000011						
N. 1.0 A12	Positive Control	AB-000012	20	107233	115.764000	AB-000012						
N. 1.0 B01	Positive Control	AB-000013	20	107233	115.764000	AB-000013						
N. 1.0 B02	Compound	AB-000014	20	107233	115.764000	AB-000014						
N. 1.0 B03	Compound	AB-000015	20	107233	115.764000	AB-000015						
N. 1.0 B04	Compound	AB-000016	20	107233	115.764000	AB-000016						
N. 1.0 B05	Compound	AB-000017	20	107233	115.764000	AB-000017						

Inventory

Container ID	Name	CAS	Substance	Barcode	Container Status	Expires On	Ordered On
1115	scortyphene	121-71-1	3-INDOLYLACETONITRILE	154	Available	11/20/2010	
1112	3,4-DI(1,2,5-OXYDIHYDRO)NADIC	121212-00-2	1,4-BIS(2,5-OXYDIHYDRO)NADIC	213	Available	11/20/2010	12/12/2002
1229	HF		HYDROFLUORIC ACID	272	Available	11/20/2010	2/15/2002
1206	Charge Quantity		Fluorobenzene	331	Available	11/20/2010	
1243	Request Duplicate Container (Add to Cart)		ZINC HYDROXIDE	399	Available	11/20/2010	
1240	Request Duplicate Container (Add to Cart)		Chloroform	449	Available	11/20/2010	
1146	Request Duplicate Container (Add to Cart)		Chloroform	462	Available	11/20/2010	10/12/2002
1145	Request Duplicate Container (Add to Cart)		Chloroform	464	Available	11/20/2010	10/12/2002
1140	Request Duplicate Container (Add to Cart)		Chloroform	465	Available	11/20/2010	10/12/2002
1140	Request Duplicate Container (Add to Cart)		Chloroform	466	Available	11/20/2010	10/12/2002
1142	Request Duplicate Container (Add to Cart)		Chloroform	467	Available	11/20/2010	10/12/2002
1147	Request Duplicate Container (Add to Cart)		Chloroform	468	Available	11/20/2010	10/12/2002
1571	3,4-DI(1,2,5-OXYDIHYDRO)NADIC	121212-00-2	1,4-BIS(2,5-OXYDIHYDRO)NADIC	424	Available	11/20/2010	
1665	METHYLENE SOLUTION	74-98-5	METHYLENE SOLUTION	722	Available	11/20/2010	
1722	PIWAVE	475-95-2	PIWAVE	791	Available	11/20/2010	

ELN

Product	MP	Actual Yield	Actual MW	Yield	Purity	MW	Eq	Dist. Mt.	Test Date	Yield
1. 1-methyl-3-(methylamino)propan-1-amine		203.326	1.000							203.326

- ✓ Búsqueda rápida (structure, text, scientist, etc.)
- ✓ Evita duplicar experimentos
- ✓ Estandariza el formato de los datos
- ✓ Protección de Propiedad Intelectual
- ✓ Audit Trail
- ✓ Backups
- ✓ crea reportes en forma rápida y sencilla.

Cloud Computing

- Beneficios -



- No requiere inversion en infraestructura
- Los costos incluye
 - Costo de adquisicion inicial
 - Costo de instalacion
 - Costo de adopcion
 - Costo de soporte
- Es un ambiente de trabajo coherente
- Es escalable

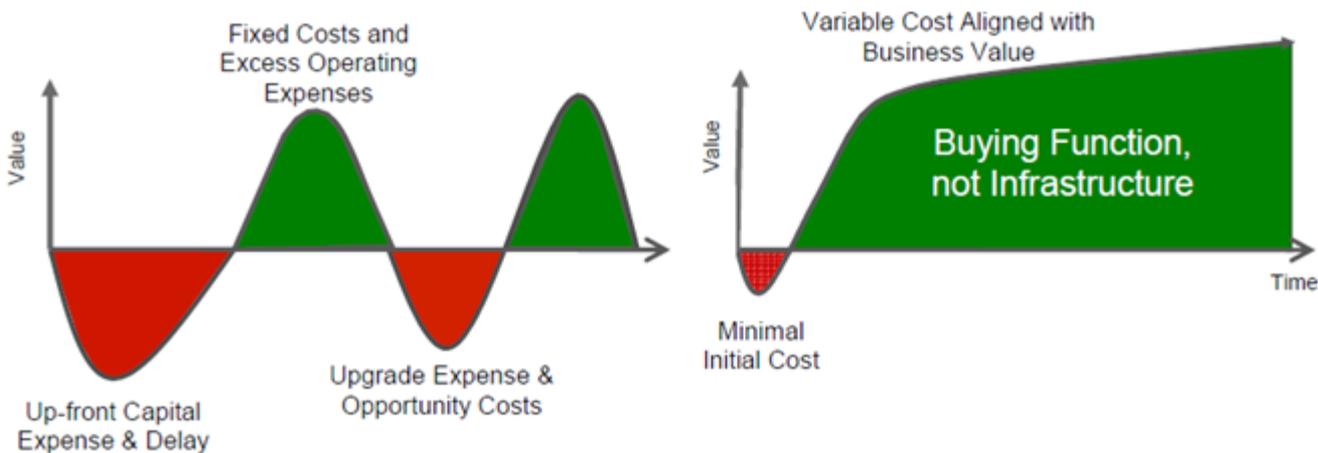
Cloud Computing

- ROI -

Faster Results; Lower Risks; Predictable Costs

On-Premise Operations:
53% of software projects cost
189% of original estimate¹

Cloud Computing:
Average **49% ROI**
within 10 Months²



¹ Standish Group, Chaos Report 2006

² Third-Party CustomerSat Research on 4,165 Salesforce.com customers, February 2008